Heisenberg Modelに於けるGreen関数法

小口, 明秀

Heisenberg Model に於ける Green 関数法

東教大理　　小　口　明　秀

（２月１２日受理）

§ 1. 序

Heisenberg model に対する Green 関数理論は，Tjablikov の R.P.A 以来，様々の decoupling が試みられて，異なった結果を与えている。[1] しかし全温度領域で，物理的な結果を与えている近似は，R.P.A. が一番良いと思われるが，低温に於てスピン波の振動数の温度依存性が磁化 σ に比例し，その結果 $T^{3/2}$ の振舞をして，magnon 近似の $T^{5/2}$ と異なっている。M.Bloch[2] は Dyson−Maleev 変換によるボーズ粒子による Dyson Hamiltonian を基にして，HF 近似を用いて，低温では Dyson の結果とほぼ一致する結果を得た。それによるとスピン波の振動数は $T^{5/2}$ に比例しているが，相転移が first order で，近似は温度上昇とともに悪くなっている。また，解が当然みたすべき磁化の磁場に対する反対称性，$\sigma(H) = -\sigma(-H)$ をみたしていない。分子場は変分（Free−energy 極少）をみたしているのに対して，R.P.A，及びその他の decoupling による近似が，変分をみたしているかどうかは明らかでない。相転移の様な問題を扱う時には，特に変分をみたしている事が必要であり，decoupling による定性的にも異なった結果は，この要求によって，選択されるはずである。我々は，新しい Green 関数[3] を用いて Heisenberg model を考えてみた。結果は低温では，スピン波の振動数が，M.Bloch に一致する $T^{5/2}$ 依存性を持ち，１次元，２次元で自発磁化がなく，３次元で Curie 温度 T_c が分子場と一致し，$\sigma(H) = -\sigma(-H)$ をみたす。近似 Eq.(6) は，K.Sawada の変分法[4] により，Eq.(6) となる model Hamiltonian H_0 があれば変分となっている。しかし Eq(15) が近似として加わる為に，Free−energy 極少をみたしているか明らかでない。只，低温で boson Hamiltonian の HF 近似（変分をみたす）に Spin エネルギーが一致し，Curie 温度が分子場（変分をみたす）に一致している事は，何らかの変分を示唆していると思われる。

§ 2. Green 関数

$S=\frac{1}{2}$ の Heisenberg Hamiltonian

$$H=-g\mu H\sum_f S_f^z-\sum_{f,m} I(f-m)\,\mathbf{S}_f\cdot\mathbf{S}_m \tag{1}$$

を Pauli operator

$$S_f^+=b_f,\quad S_f^-=b_f^+,\quad S_f^z=\frac{1}{2}-b_f^+b_f=\frac{1}{2}-n_f \tag{2}$$

を用いて書きなおすと，次の様になる。

$$H=\varepsilon_0+\sum_f(J(0)+g\mu H)\,n_f-\sum_{f,m} I(f-m)\,b_f^+b_m-$$
$$-\sum_{f,m} I(f-m)\,n_f n_m \tag{3}$$

ここで

$$I(f-m)=\frac{1}{N}\sum_q J(q)\,e^{iq(f-m)}$$
$$\varepsilon_0=-\frac{1}{4}NJ(0)-\frac{1}{2}g\mu HN \tag{4}$$

また，Hは外場で，添字 f,m 等は site number である。Pauli operator は次の交換関係を持っている。

$$[b_f,\ b_m^+]=\delta_{f,m}(1-2n_f)=\delta_{f,m}\,\sigma_f \tag{5}$$

t時間の operator を0時間の operator で展開して次の近似をとる。

$$\theta(t)\,b_g(t)=\sum_f G_{gf}(t)\,b_f \tag{6}$$

近似の意味は展開を第一項のみで切った事にあり，普通の bose，fermi型の交換関係の operator の時は（6）の近似は，H.F.A となるが，今の場合（5）によって近似は，H.F.A 以上を意味している。（6）の展開係数を Green 関数と呼ぶ。それは（6）式の両辺と b_f^+ の commutator を作り平均をとると，

$$\sigma G_{gf}(t) = \langle [\theta(t)\, b_g(t),\ b_f^+] \rangle \tag{7}$$

となる事より明らかである。ここで並進対称性を考えて $\langle \sigma_f \rangle = \sigma$ とした。

(6) 式より

$$i\frac{d}{dt}\theta(t)b_g(t) = i\,\delta(t)\, b_g + [\theta(t)\, b_g(t), H]$$

$$= i\,\delta(t)\, b_g + \sum_f G_{gf}(t)\,[b_f, H] \tag{8}$$

(8) 式の両辺と b_ℓ^+ との commutator を作り平均をとって (7) を代入すると

$$\begin{aligned} i\frac{d}{dt}\sigma G_{g\ell}(t) &= i\,\sigma\,\delta_{g\ell}\,\delta(t) + \sigma G_{g\ell}(t)(g\mu H + J(0)) \\ &- \sigma \sum_f G_{gf}\, I(f-\ell) + 2G_{g\ell}(t) \sum_m I(\ell-n) \langle b_\ell^+ b_m \rangle \\ &- \sum_f G_{gf}(t) 2\, I(f-\ell) \langle b_\ell^+ b_f \rangle + 2\langle n \rangle \sum_f G_{gf}(t)\, I(f-\ell) \\ &- 2\langle n \rangle \sum_m G_{g\ell}(t)\, I(\ell-m) + 4\sum_m G_{g\ell}(t)\, I(\ell-m) \langle n_\ell n_m \rangle \\ &- 4\sum_f G_{gf}(t)\, I(f-\ell) \langle n_f n_\ell \rangle . \end{aligned} \tag{9}$$

並進対称性より，逆格子ベクトルにフーリエ変換すると

$$G_{gf}(\omega) = \frac{1}{N}\sum_q G_q(\omega)\, e^{iq(g-f)}$$

(9) より

$$G_q(\omega) = \frac{i}{2\pi}\,\frac{1}{\omega - \varepsilon_q} \tag{10}$$

ここで

$$\begin{aligned} \varepsilon_q &= g\mu H + (J(0)-J(q))\left(1-\frac{2n}{\sigma}\right) + \frac{2}{N\sigma}\sum_p (J(p)-J(p-q)) \langle b^+ b \rangle_p \\ &+ \frac{4}{N\sigma}\sum_p (J(p)-J(p-q)) \langle n\, n \rangle_p \end{aligned} \tag{11}$$

$\langle b^+ b \rangle_p$ は Fluctuation－Dissipation 定理より

$$\langle b^+ b\rangle_p = \int f(\omega)\,\sigma\left[G_p(\omega+i\varepsilon)-G_p(\omega-i\varepsilon)\right]d\omega$$

$$= \sigma\, f(\varepsilon_p) = \sigma\, f_p \tag{12}$$

ここで

$$f_p = \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_p}-1}$$

nearest neighbour のみの interaction を考えると

$$\Sigma_p (J(p)-J(p-q))\langle nn\rangle_p = \frac{J(0)-J(q)}{J(0)}\sum_p J(p)\langle nn\rangle_p$$

$$\equiv \eta_q \sum_p J(p)\langle nn\rangle_p \tag{13}$$

Hamiltonian より

$$\Sigma_f \langle b_f^+ [b_f, H]\rangle = (g\mu H + J(0))\sum_f n_f - \Sigma_{fm} I(f-m)\langle b_f^+ b_m\rangle$$

$$- 2\sum_{f,m} I(f-m)\langle n_m n_f\rangle \tag{14}$$

Green 関数を使って

$$\Sigma_q\, \sigma f_q \varepsilon_q = (g\mu H + J(0))N\langle n\rangle - \sum_p J(p)\langle b^+ b\rangle_p$$

$$- 2\Sigma J(p)\langle nn\rangle_p \tag{15}$$

(11), (13) を (15) に代入して $\sum_p J(p)\langle nn\rangle_p$ を求めて，(11) に代入すると

$$\varepsilon_q = g\mu H + (J(0) - J(q))/K \tag{16}$$

ここで，

$$K = 1 + \frac{2}{N}\Sigma_p \frac{J(0)-J(p)}{J(0)} f_p \tag{17}$$

(10), (12), (16) 及び (17) より

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{1}{N}\Sigma_p\ \mathrm{cth}\frac{\beta\varepsilon_p}{2} \tag{18}$$

$$\varepsilon_p = g\mu H + (J(0)-J(q))/K$$

$$= g\mu H + \frac{\sigma\,(J(0)-J(p))}{1-\frac{\sigma}{NJ(0)}\sum J(q)\,\mathrm{cth}\,\frac{\beta\varepsilon_q}{2}} \qquad (19)$$

この解は $\sigma(H)=-\sigma(-H)$ をみたし Tjablikov の

$$\varepsilon_p = g\mu H + \sigma\,(J(0)-J(p))$$

に比してエネルギーの繰込 factor がつけ加わっている。

§3. 低温展開

(18) より

$$\sigma = 1/_{1+2P} = 1-2P+4P^2+\cdots\cdots \qquad (20)$$

$$P = \frac{1}{N}\sum_p f_p = \frac{1}{N}\sum_n\sum_p e^{-(n+1)\beta\varepsilon_p} \qquad (21)$$

$$= Z(\tfrac{3}{2})(\theta K)^{3/2} + \frac{3\pi}{4}Z(\tfrac{5}{2})(\theta K)^{5/2} + \frac{33}{32}\pi^2 Z(\tfrac{7}{2})(\theta K)^{7/2} + \cdots\cdots$$

ここで

$$\theta = \frac{T}{4\pi J}, \qquad Z(\tfrac{\alpha}{2}) = \sum_n \frac{e^{-ng\mu H\beta}}{(n)^{\alpha/2}}$$

また

$$K = 1 + 2\pi Z(\tfrac{5}{2})\theta^{5/2} + \cdots\cdots \qquad (22)$$

(22) を (11), (21) に代入して

$$\varepsilon_p = g\mu H + (J(0)-J(p))(1-2\pi Z(\tfrac{5}{2})\theta^{5/2}+\cdots) \qquad (23)$$

$$P = Z(\tfrac{3}{2})\theta^{3/2} + \frac{3\pi}{4}Z(\tfrac{5}{2})\theta^{5/2} + \frac{33}{32}\pi^2 Z(\tfrac{7}{2})\theta^{7/2}$$

$$+ 3\pi Z(\tfrac{3}{2})Z(\tfrac{5}{2})\theta^4 + \cdots\cdots \qquad (24)$$

（23）は M.Bloch 等の boson 近似と完全に一致して，正しい温度依存性を持っている。また，boson 近似として $\sigma=1-2P$ までとると Dyson の結果と一致するが，$\sigma=1-2P+4P^2+\cdots\cdots$ に代入すると fictitious な T^3 の term があらわれて

$$\sigma=1-2\left\{Z\left(\frac{3}{2}\right)\theta^{3/2}+\frac{3\pi}{4}Z\left(\frac{5}{2}\right)\theta^{5/2}+\frac{33}{32}\pi^2 Z\left(\frac{7}{2}\right)\theta^{7/2}\right\}$$

$$+4Z\left(\frac{3}{2}\right)^2\theta^3+\cdots\cdots \tag{25}$$

となる。

§4. Curie 温度

Curie 温度は $H\to 0$ $\sigma\to 0$ として求まる。

$$\frac{1}{\sigma}=\frac{1}{N}\sum_p \mathrm{cth}\frac{\beta\varepsilon_p}{2}=\frac{2}{N\beta}\sum_p\frac{1}{\sigma(J(0)-J(p))}\left[1-\frac{\sigma}{N}\sum_q\frac{J(q)}{J(0)}\mathrm{cth}\frac{\beta\varepsilon_q}{2}\right]$$

$$=\frac{2}{\sigma\beta}F(-1)B \tag{26}$$

ここで，

$$F(-1)=\frac{1}{N}\sum_p\frac{1}{J(0)-J(p)} \tag{27}$$

及び

$$B=1-\frac{\sigma}{N}\sum_q\frac{J(q)}{J(0)}\mathrm{cth}\frac{\beta\varepsilon_q}{2}=1-\frac{\sigma}{N}\sum_q\frac{J(q)}{J(0)}\frac{2B}{\beta\sigma(J(0)-J(q))} \tag{28}$$

（28）よりBを求めて（26）に代入すると

$$\beta_c J=1/3=0.33 \tag{29}$$

自発磁化は（18）より1次元，2次元で積分が発散して $\sigma=0$ となり存在しない。3次元の Curie 温度 $\beta_c J=0.33$ は分子場のそれと一致している。また，（29）を（26）に代入して $T<T_c$ での σ の温度変化を計算すると

$$\sigma \propto (T_c-T)^{-1/2}$$

となり，critical index β は $\beta=1/2$ となる。

§4. 討　論

近似 Eq(6) は変分法[4]によれば，

$$\theta(t)\,b_g(t)=\theta(t)\,e^{itH_0}\,b_g\,e^{-itH_0}=\sum_f G_{gf}(t)\,b_f$$

となる H_0 を仮定している事を意味し，その時 H を H_0 におきかえる事は，Free energy stationary の変分をみたす。Eq(14) 迄は H_0 の範囲で議論しているが，Eq(14) から (15) に移行する時，左辺を fluctuation－dissipation で計算する為，時間のずれた所で $\bar{H}$ を H_0 にすりかえなければならず，ここで変分が破れている。しかし結果は，序でも述べた様に，Spin 波のエネルギーの温度変化は，boson HF 近似（変分）と一致し，Curie 点は，分子場（変分）に一致している事から，何らかの方法で，Free－energy 極少が云えそうであるので，検討中である。

終りに有益な議論をして下さった沢田先生に感謝します。

References

1)　例えば
S.Katura and T.Horiguchi J.Phys. Soc. Japan 25 60 (1968)
に詳しい解説がある。
2)　M.Bloch J.Appl.Phys. 35 1151 (1963)
3)　K.Sawada (private communication)
4)　K.Sawada (to be published)